PITAGORAS

ACADEMIA

Feliz navidad

Profesor
Elison Cortez

PITAGORAS
ACADEMIA

QUÍMICA

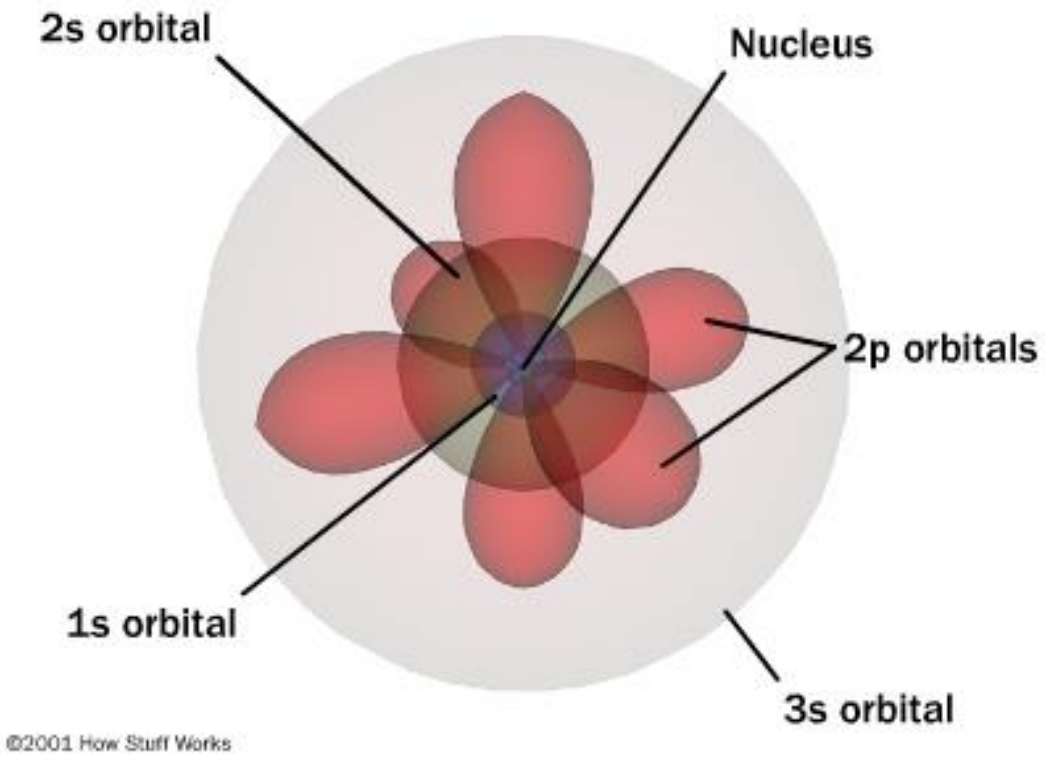
GRUPO PITÁGORAS

ESTUDIO DEL ÁTOMO

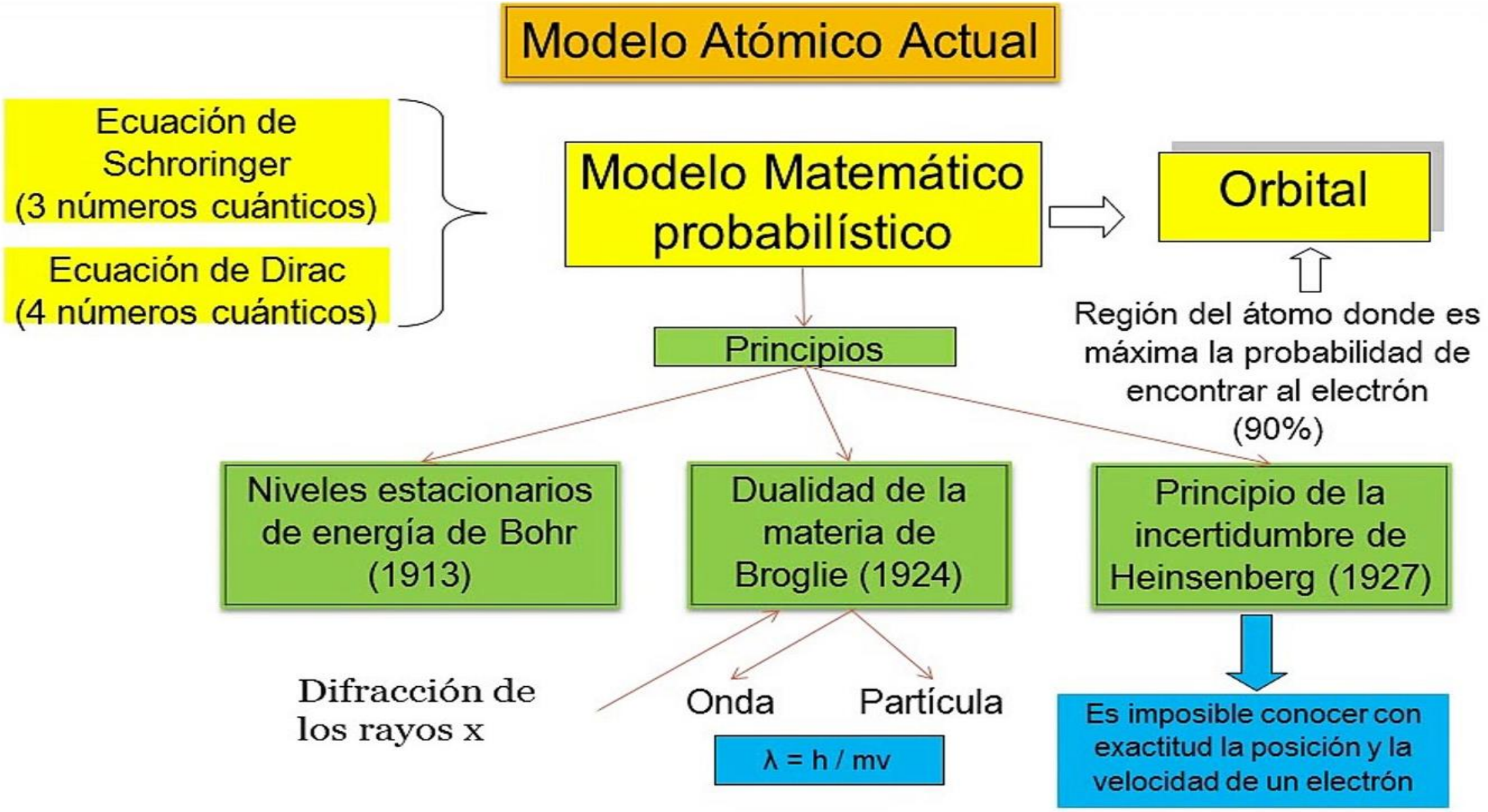
MODELO ATÓMICO ACTUAL

ÁTOMO ACTUAL

En la actualidad, el átomo es considerado como un sistema energético en equilibrio, representado por un modelo matemático – probabilístico. Para comprender mejor y describir el comportamiento de las partículas subatómicas, los científicos desarrollaron la denominada **Mecánica Cuántica**, según la cuál los electrones tienen propiedades de onda y de partícula. El **modelo atómico actual** o **modelo mecano-cuántico**, se basa en 3 principios fundamentales:



ÁTOMO ACTUAL

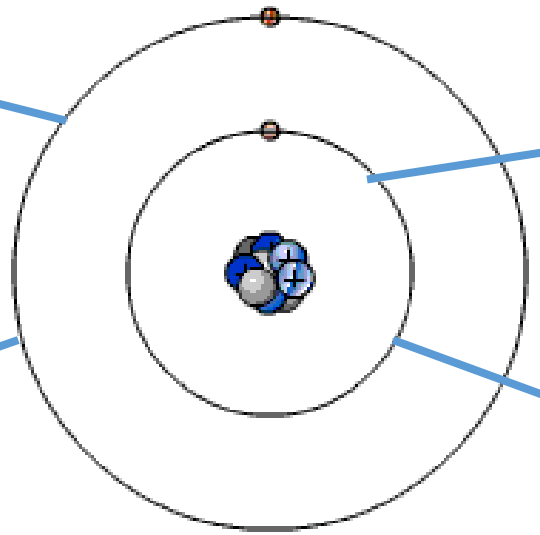


ÁTOMO ACTUAL

01. Niels Bohr: En 1913, introduce la teoría de que los electrones viajan en órbitas circulares alrededor del núcleo. Introdujo la idea de que un electrón puede caer de una órbita de energía más alta a una más baja, debido a la emisión de un fotón de energía (energía cuantizada).

Fa = Fc

$$E = \frac{-2{,}18 \,.\, 10^{-18}\ J}{n^2}$$



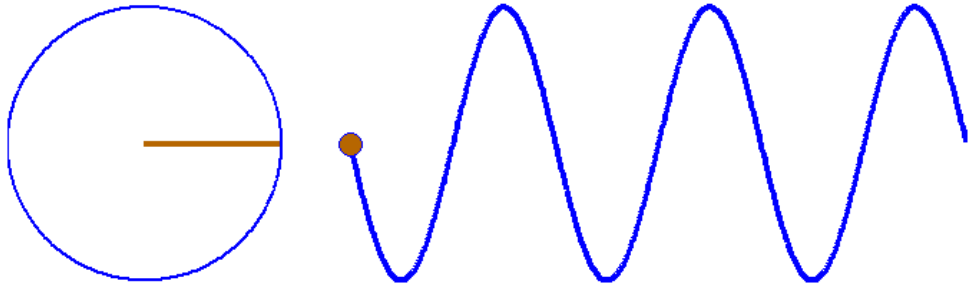
Una transición descendente implica la emisión de un fotón de energía:

$$E_{fotón} = h\upsilon = E_2 - E_1$$

m.v.r = n.(h/2π)

ÁTOMO ACTUAL

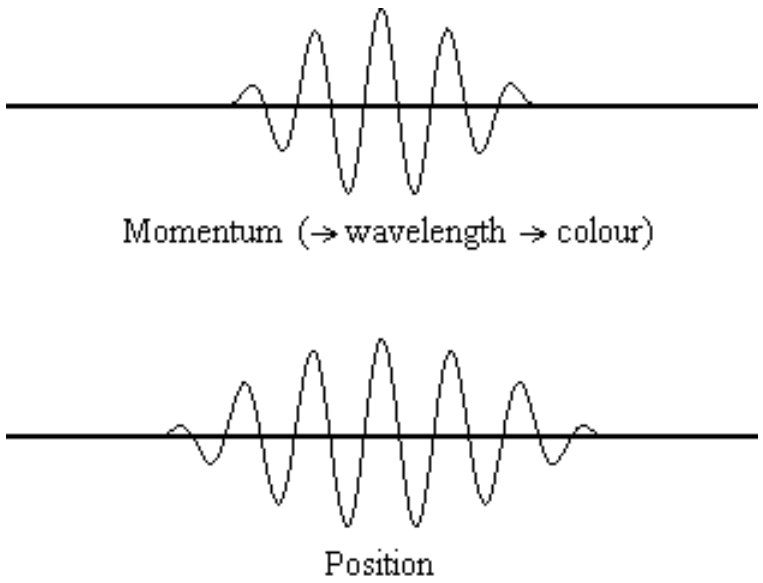
02. Louis de Broglie: En 1924 en su tesis doctoral, inspirada en experimentos sobre la difracción de electrones, propuso la existencia de ondas de materia, es decir que toda materia tenía una onda asociada a ella. Esta idea revolucionaria, fundada en la analogía de que la radiación tenía una partícula asociada (propiedad ya demostrada entonces), no despertó gran interés, pese a lo acertado de sus planteamientos, ya que no tenía evidencias de producirse.



Observación: ***Einstein*** ***reconoció su importancia y cinco años después, en 1929, De Broglie recibió el Nobel en Física por su trabajo.***

ÁTOMO ACTUAL

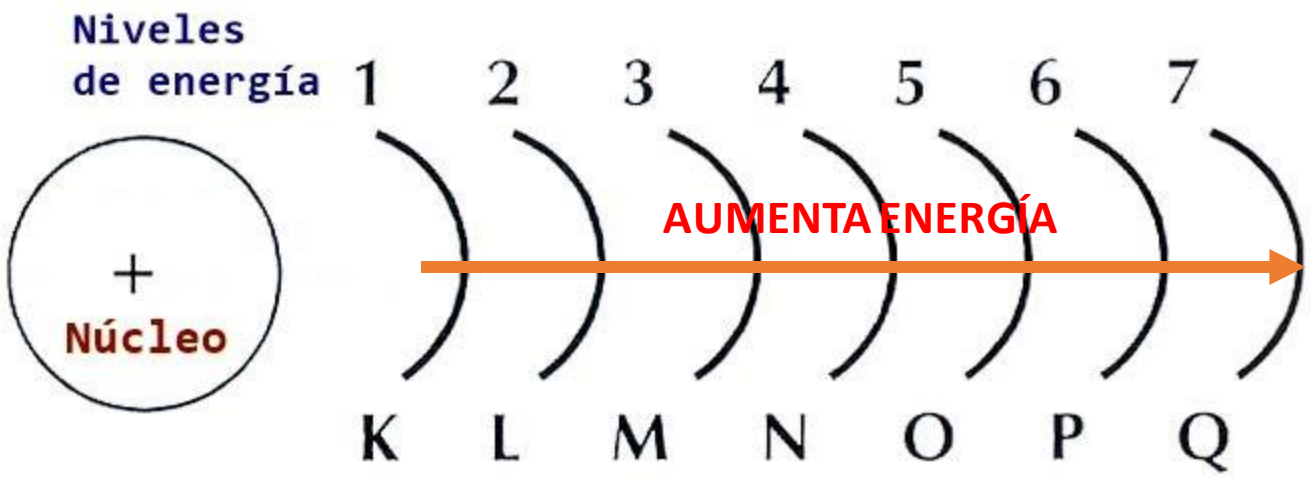
03. Werner Heisenberg: El hecho de que cada partícula lleva asociada consigo una onda, impone restricciones en la capacidad para determinar al mismo tiempo su posición y su velocidad. Este principio fue enunciado por W. Heisenberg en 1927.



Es imposible medir simultáneamente, y con una precisión absoluta, el valor de la posición y la cantidad de movimiento de una partícula determinada.

CONFORMACIÓN DE LA NUBE ELECTRÓNICA

<u>Nivel de Energía (n)</u>: Los **niveles de Energía** son estados energéticos en donde se pueden encontrar los electrones en estados estables o no, según el subnivel en que se encuentran ya sea, cerca del núcleo o en las últimas capas. Es decir son regiones electrónicas donde presentan una distancia o alejamiento promedio con respecto al núcleo atómico. **Se dividen en subniveles.**



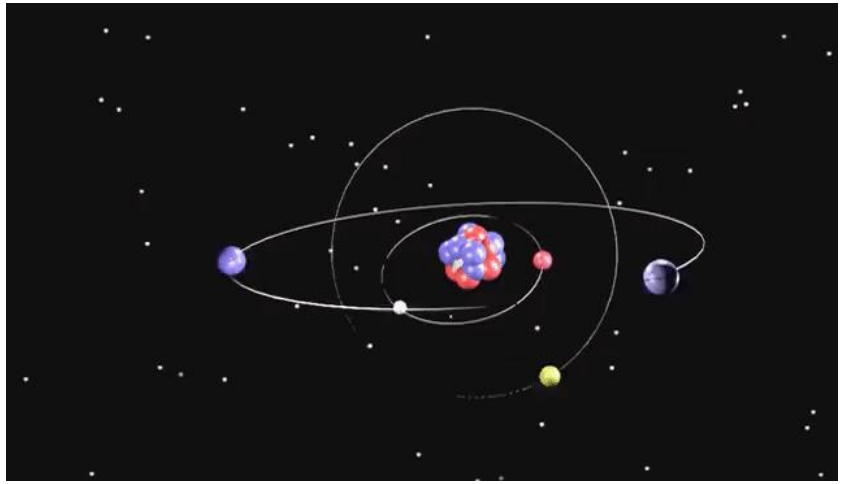
CONFORMACIÓN DE LA NUBE ELECTRÓNICA

En un nivel de energía, se tiene:

Nivel Energético	Tipo de Subnivel	Denominación del Subnivel	Número máximo de electrones	
			En el subnivel	En el nivel
1	s	1s	2	2
2	s	2s	2	8
	p	2p	6	
3	s	3s	2	18
	p	3p	6	
	d	3d	10	
4	s	4s	2	32
	p	4p	6	
	d	4d	10	
	f	4f	14	
....	....	....	....	....

Entonces, para un nivel "n", se deduce:

* Número de subniveles = n
* Número de orbitales = n^2
* Número máx. de electrones = $2n^2$



CONFORMACIÓN DE LA NUBE ELECTRÓNICA

<u>Subnivel de Energía (l)</u>: Son regiones energéticas en donde encontramos electrones con igual energía. Se designan con las letras “s”, “p”, “d” y “f” (Sharp, Principal, Difuso y Fundamental). **Contienen a los orbitales.**

Subnivel (l)	Orbitales	Número de orbitales	Número máximo de electrones
s (l = 0)	↑↓ (0)	1	2
p (l = 1)	↑↓ ↑↓ ↑↓ (-1 0 +1)	3	6
d (l = 2)	↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ (-2 -1 0 +1 +2)	5	10
f (l = 3)	↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ (-3 -2 -1 0 +1 +2 +3)	7	14

$n^o \max de\ (e-) = 4l + 2$

$n^o\ de\ orb = 2l + 1$

CONFORMACIÓN DE LA NUBE ELECTRÓNICA

Sea la siguiente configuración electrónica:

$_{17}Cl$: $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^5$

$2p^6$

NIVEL : 2
SUBNIVEL : 2p
DE ELECTRONES : 6

SUBNIVEL

$2s^2$

DE ELECTRONES

NIVEL

$3p^5$

NIVEL : 3
SUBNIVEL : 3p
DE ELECTRONES : 5

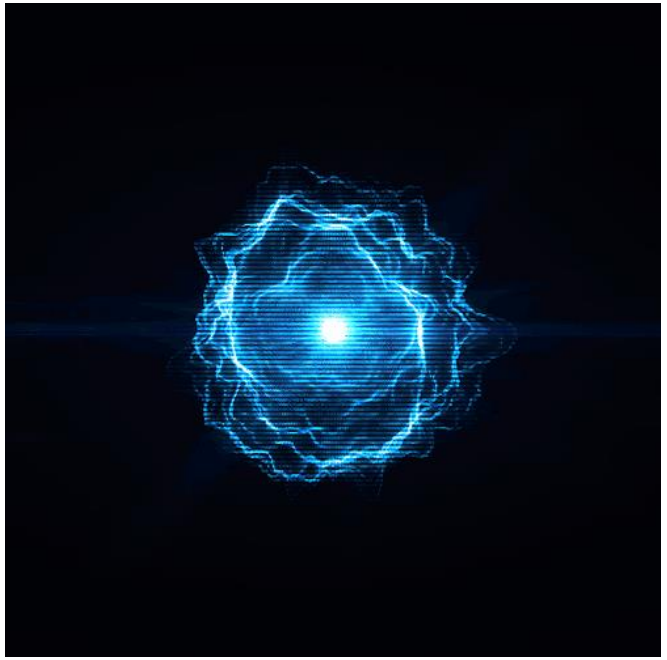
CONFORMACIÓN DE LA NUBE ELECTRÓNICA

R.E.E.M.P.E. u Orbital: Es la descripción ondulatoria del tamaño, forma y orientación de una región del espacio disponible para un electrón.

Se puede decir que es una zona del espacio donde hay una gran probabilidad, casi mayor del 90%, de encontrar al electrón, lo que supone poder considerar al electrón o electrones, como una nube indefinida cargada que gira entorno al núcleo; donde hay mayor densidad es en las zonas donde la probabilidad de encontrar al electrón, es mayor.

R.E.E.M.P.E.
u
ORBITAL

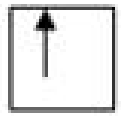
- **R**EGIÓN
- **E**SPACIAL
- **E**NERGÉTICA DE
- **M**AYOR
- **P**ROBABILIDAD
- **E**LECTRÓNICA

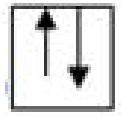


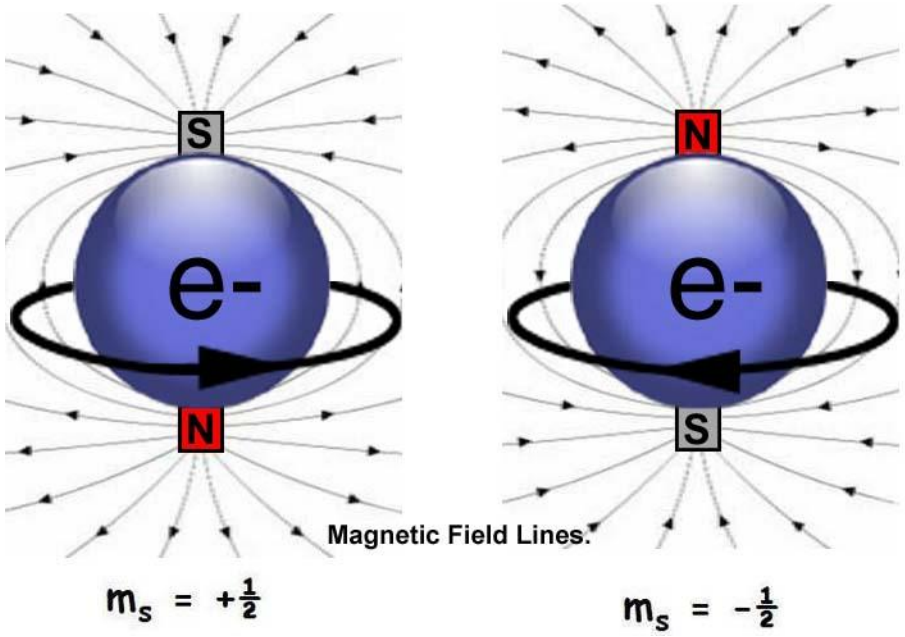
CONFORMACIÓN DE LA NUBE ELECTRÓNICA

Representación práctica de un orbital:

Orbital vacío:

Orbital semilleno:  **Contiene 1 electrón desapareado**

Orbital lleno o saturado:  **Contiene 2 electrones apareados**

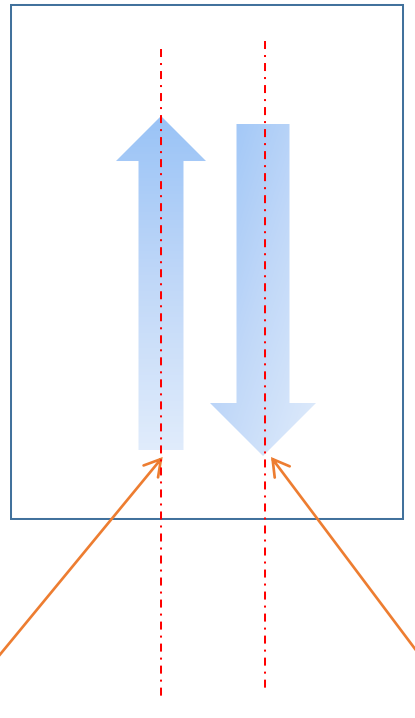


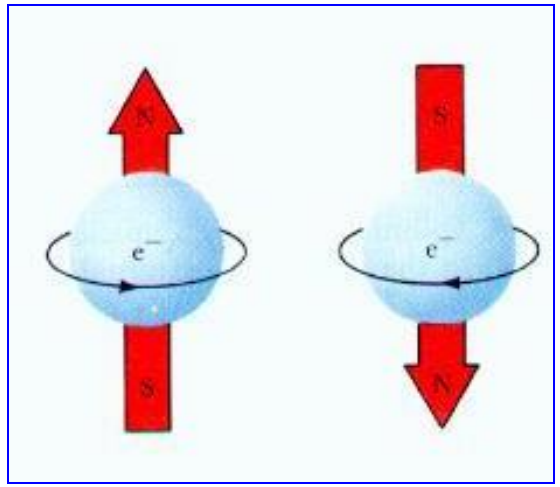
Las flechas (↑;↓) representan la orientación de giro (spin) rotacional del electrón.

CONFORMACIÓN DE LA NUBE ELECTRÓNICA

Entonces:

EN CUALQUIER ORBITAL





+ 1/2

GIRO ANTIHORARIO

- 1/2

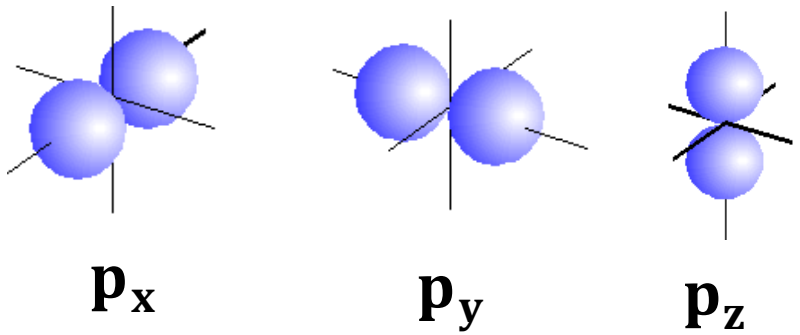
GIRO HORARIO

CONFORMACIÓN DE LA NUBE ELECTRÓNICA

Para los diferentes subniveles, se tiene:

s	☐			**1 ORBITAL**
	0			
p	☐	☐	☐	**3 ORBITALES**
	p_x	p_y	p_z	

ORIENTACIÓN ESPACIAL DE LOS ORBITALES



ORBITALES "p"

MODELO ATÓMICO ACTUAL

Números Cuánticos (N.C.)

Son parámetros matemáticos que nos indican las formas y orientaciones espaciales de los orbitales atómicos; así como también, nos describen la ubicación y comportamiento del electrón alrededor del núcleo y nos habla de la naturaleza cuantizada de su energía.

ECUACIÓN DE ONDA (SCHRÖDINGER)

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}+\frac{8\pi^2 m}{h^2}(E-V)\Psi=0$$

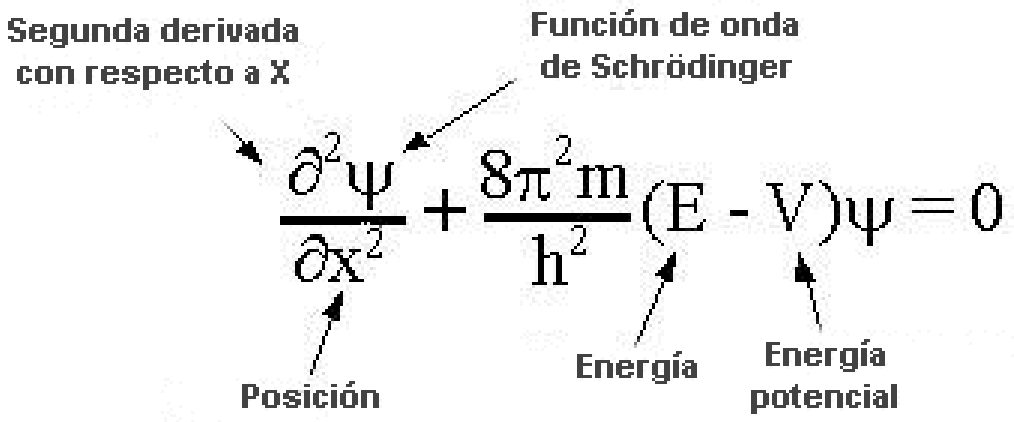
Para su solución, se introducen 3 N.C.:

*** Número Cuántico Principal (n)**

*** Número Cuántico Secundario (l)**

*** Número Cuántico Magnético (m_l)**

Donde:



* El grado en que un electrón o partícula elemental se comporte como onda, es el que sea posible describirlo como una **función de onda (Ψ)**.

* El cuadrado de la función de onda (**Ψ^2**), define la distribución de la densidad electrónica en el espacio alrededor del núcleo.

MODELO ATÓMICO ACTUAL

ECUACIÓN DE ONDA RELATIVISTA (PAUL DIRAC)

En 1928, Paul Dirac reformuló la mecánica cuántica no relativista de Schrödinger teniendo en cuenta la teoría de la relatividad Einstein, creando la mecánica cuántica relativista.

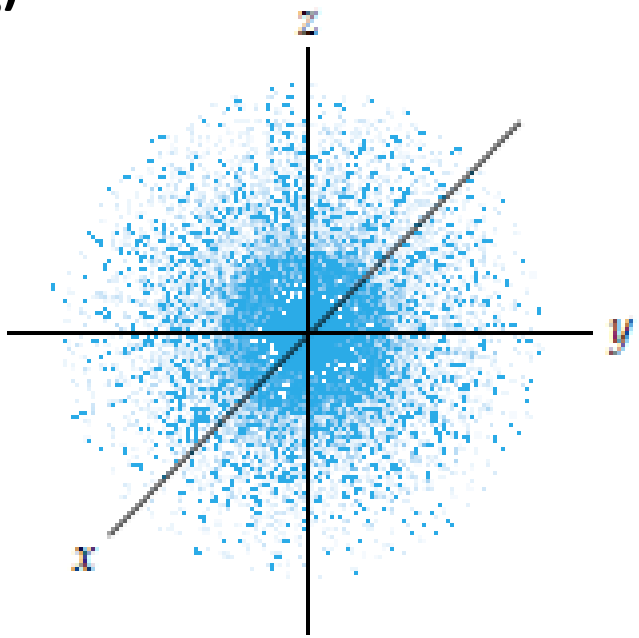
Para su solución, además de los N.C. anteriores, se necesitó introducir un cuarto N.C.:
*** Número Cuántico Spin (m_s)**

OBSERVACIONES:

* n : Define un nivel de energía
* n y l : Definen un subnivel de energía
* **n; l y m_l** : Definen un **orbital (R.E.E.M.P.E.)**
* n; l; m_l y m_s : Definen un electrón

R : REGIÓN
E : ESPACIAL
E : ENERGÉTICA
M : MÁXIMA
P : PROBABILIDAD
E : ELECTRÓNICA

Para un orbital:
*** n ⇒ Indica el tamaño de la nube**
*** l ⇒ Indica la forma de la nube**
*** m_l ⇒ Indica la orientación espacial**



Distribución de densidad electrónica en el estado basal del átomo de hidrógeno.

MODELO ATÓMICO ACTUAL

CARACTERÍSTICAS DE LOS NÚMEROS CUÁNTICOS

N.C. / Característica	Principal	Secundario o Azimutal (*)	Magnético	De spin electrónico
Símbolo	n	ℓ	m_ℓ	m_s
Valores permitidos	1; 2; 3; 4; 5; 6; 7; ...	0; 1; 2; 3; ... (n-1)	$-\ell$; ...; 0; ... $+\ell$	$+\frac{1}{2}$; $-\frac{1}{2}$
Número de valores	Teóricamente infinito	n	$2\ell + 1$	2
Describe para el orbital	Tamaño	Forma	Orientación espacial	No está asociado
Determina para el electrón	Nivel de energía	Subnivel de energía	Orbital (REEMPE)	Sentido de giro alrededor de su eje propio

* También se llama N.C de momento angular

MODELO ATÓMICO ACTUAL

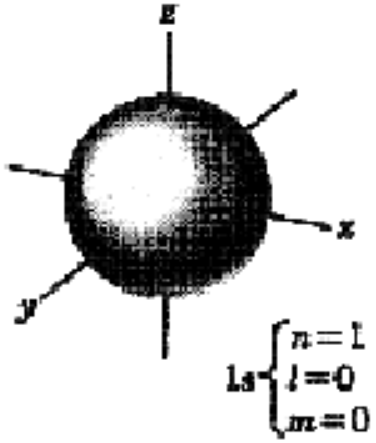
COMBINACIÓN DE NÚMEROS CUÁNTICOS

VALORES DE "n"	VALORES DE "ℓ"	VALORES DE "m_ℓ"
$n = 1$	$\ell = 0$ (1s)	$m = 0$
$n = 2$	$\ell = 0$ (2s) $\ell = 1$ (2p)	$m = 0$ $m = -1, 0, +1$
n = 3	ℓ = 0 (3s) ℓ = 1 (3p) ℓ = 2 (3d)	m = 0 m = –1, 0, +1 m = –2, –1, 0, +1, +2
n = 4	ℓ = 0 (4s) ℓ = 1 (4p) ℓ = 2 (4d) ℓ = 3 (4f)	m = 0 m = –1, 0, +1 m = –2, –1, 0, +1, +2 m = –3, –2, –1, 0, +1, +2, +3

MODELO ATÓMICO ACTUAL

ORIENTACIONES ESPACIALES DE LOS ORBITALES

Subnivel "s" (ml = 0) → 1 orbital
→ 1 orientación

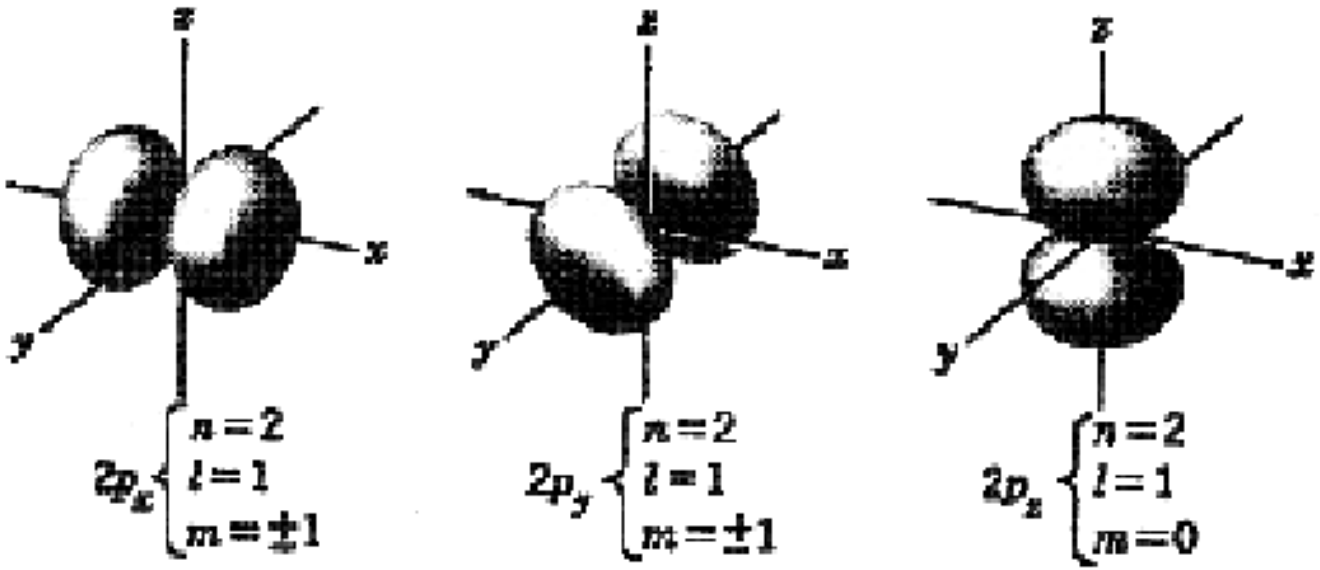


∴ Subnivel (s) < > $\overline{\quad s}$

MODELO ATÓMICO ACTUAL

Subnivel p → 3 orbitales

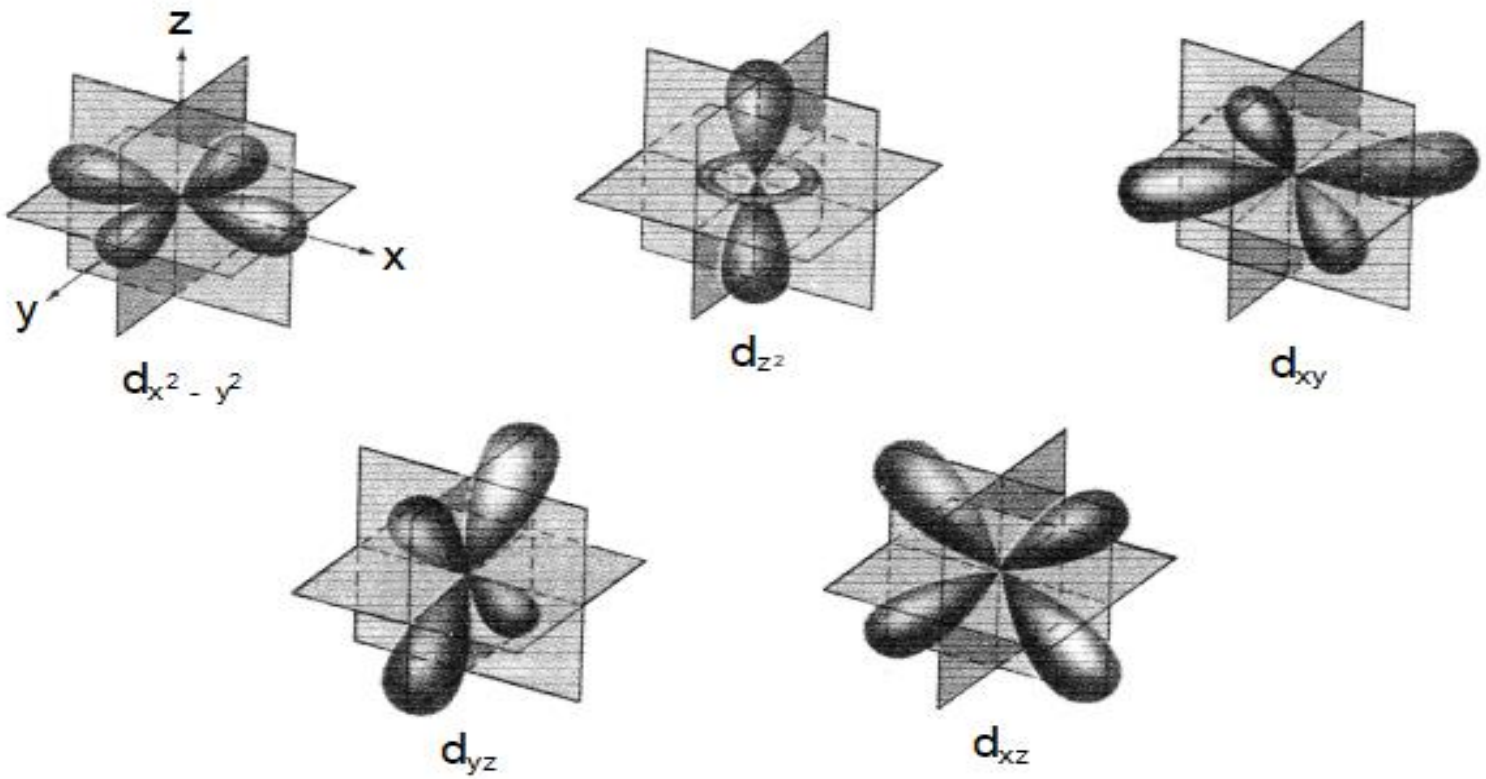
→ 3 orientaciones diferentes



$$\therefore \quad \boxed{\text{Subnivel } p \;<>\; \frac{p_x}{-1} \quad \frac{p_y}{0} \quad \frac{p_z}{+1}}$$

MODELO ATÓMICO ACTUAL

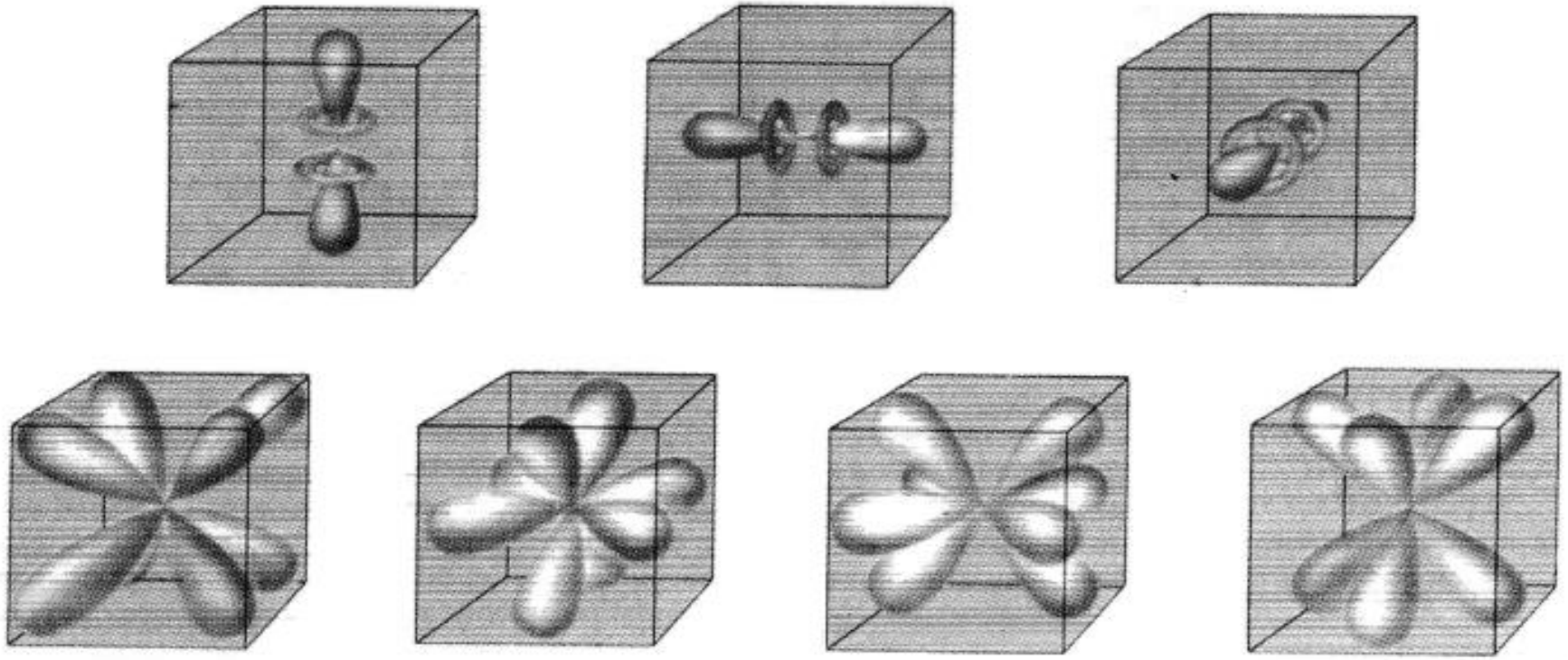
Subnivel (d) → 5 orbitales
Subnivel (d) → 5 orientaciones diferentes



∴ Subnivel (d) <> $\overline{-2}$ $\overline{-1}$ $\overline{0}$ $\overline{+1}$ $\overline{+2}$

MODELO ATÓMICO ACTUAL

Subnivel f → 7 orbitales
Subnivel f → 7 orientaciones diferentes



∴ Subnivel f <> $\overline{-3}$ $\overline{-2}$ $\overline{-1}$ $\overline{0}$ $\overline{+1}$ $\overline{+2}$ $\overline{+3}$

MODELO ATÓMICO ACTUAL

NOTACIÓN CUÁNTICA PARA UN ELECTRÓN

Es una forma de indicar los cuatro probables números cuánticos para un electrón dentro de un átomo, para lo cual se debe tener en cuenta lo siguiente :

$$\boxed{\Psi(n\,;l\,;m_l\,;m_s)}$$

Ejemplos :

1. Sea la combinación cuántica :

$$\Psi(2;\,1;\,-1;\,+1/2)$$

donde :

* $n = 2 \Rightarrow l = 0\,;\ 1$
* $l = 1 \Rightarrow m_l = -1\,;\,0\,;\,+1$
* $m_s = +1/2$

∴ Es un conjunto de valores permitidos

2. Sea la combinación cuántica :

$$\Psi(3;\,4;\,-2;\,-1/2)$$

donde :

* $n = 3 \Rightarrow l = 0\,;\,1\,;\,2$

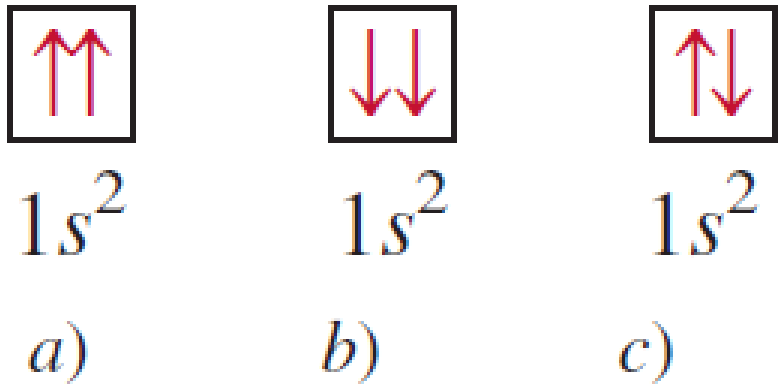
∴ "l" no toma el valor 4, entonces no es un conjunto de valores permitidos

MODELO ATÓMICO ACTUAL

Principio de Exclusión de Pauli:

Para que el orbital de un átomo sea estable, puede contener como máximo dos electrones con espines antiparalelos. Es decir, solo dos electrones pueden coexistir en el mismo orbital atómico y deben tener espines opuestos. **No pueden tener los 4 N.C. iguales.**

Para el átomo de $_2He$, se pueden colocar de tres formas diferentes sus dos electrones en el orbital 1s:



Los diagramas (a) y (b) son imposibles porque los espines son paralelos, por lo que el orbital sería inestable. Únicamente la configuración en (c) es físicamente aceptable.

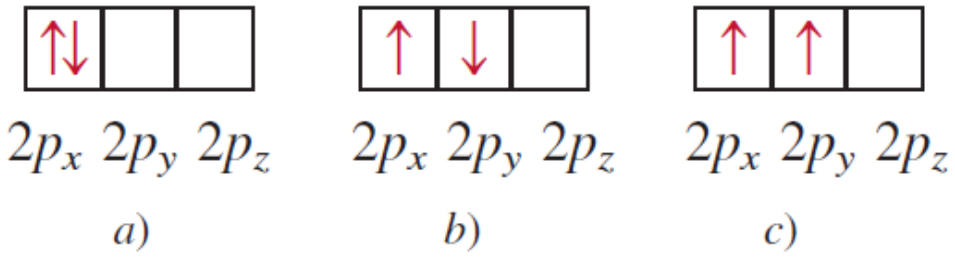
MODELO ATÓMICO ACTUAL

Regla de Hund: (Regla de Máxima Multiplicidad)

Al distribuir electrones en orbitales de un mismo subnivel, primero se trata de ocupar todos los orbitales antes de llenarlos; es decir, los electrones deben tener igual sentido de espín antes de aparearse.

Sea un subnivel 2p con dos electrones:

$2p^2$:



Ninguna de las distribuciones viola el principio de exclusión de Pauli, pero la distribución más estable es aquella que tiene el mayor número de espines paralelos. Por lo tanto, la distribución del diagrama (c) es la correcta.

MODELO ATÓMICO ACTUAL

Configuración Electrónica (C.E.):

La distribución de los electrones de un átomo, en sus respectivos niveles y subniveles, se realiza teniendo en cuenta el **Principio de Construcción (AUFBAU)**, el cuál indica que los electrones deben ocupar los subniveles de energía de acuerdo a su Energía Relativa (E.R) creciente.

$$E_R = n + \ell$$

Ejemplo:

Subnivel	n	ℓ	E_R
4p	4	1	5
5d	5	2	7
4s	4	0	4

* Si dos subniveles tienen igual energía relativa, la menor energía corresponde al menor valor de “n” (mas estable).
* Se denominan **“orbitales degenerados”** a los orbitales que pertenecen a un mismo subnivel (poseen igual energía).

MODELO ATÓMICO ACTUAL

REGLA DEL SERRUCHO (Regla de Möller)

Niveles	1	2	3	4	5	6	7
Capas	K	L	M	N	O	P	Q
SUBNIVELES	s^2	s^2	s^2	s^2	s^2	s^2	s^2
		p^6	p^6	p^6	p^6	p^6	p^6
			d^{10}	d^{10}	d^{10}	d^{10}	
				f^{14}	f^{14}		
Número máximo de electrones por nivel	2	8	18	32	32	18	8
	Niveles completos				Niveles incompletos		
Capacidad máxima	2	8	18	32	50	72	98

MODELO ATÓMICO ACTUAL

La forma de mostrar cómo se distribuyen los electrones en un átomo es a través de la configuración electrónica. El orden en que se llenan los niveles de energía es: 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p. El esquema de llenado de las órbitas atómicas, podemos tenerlo usando la regla diagonal, para ello debemos seguir cuidadosamente la flecha del esquema que comienza en 1s; siguiendo la flecha podemos completar las órbitas con los electrones correctamente.

$$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 4s^2\ 3d^5$$

Cantidad de electrones en el subnivel

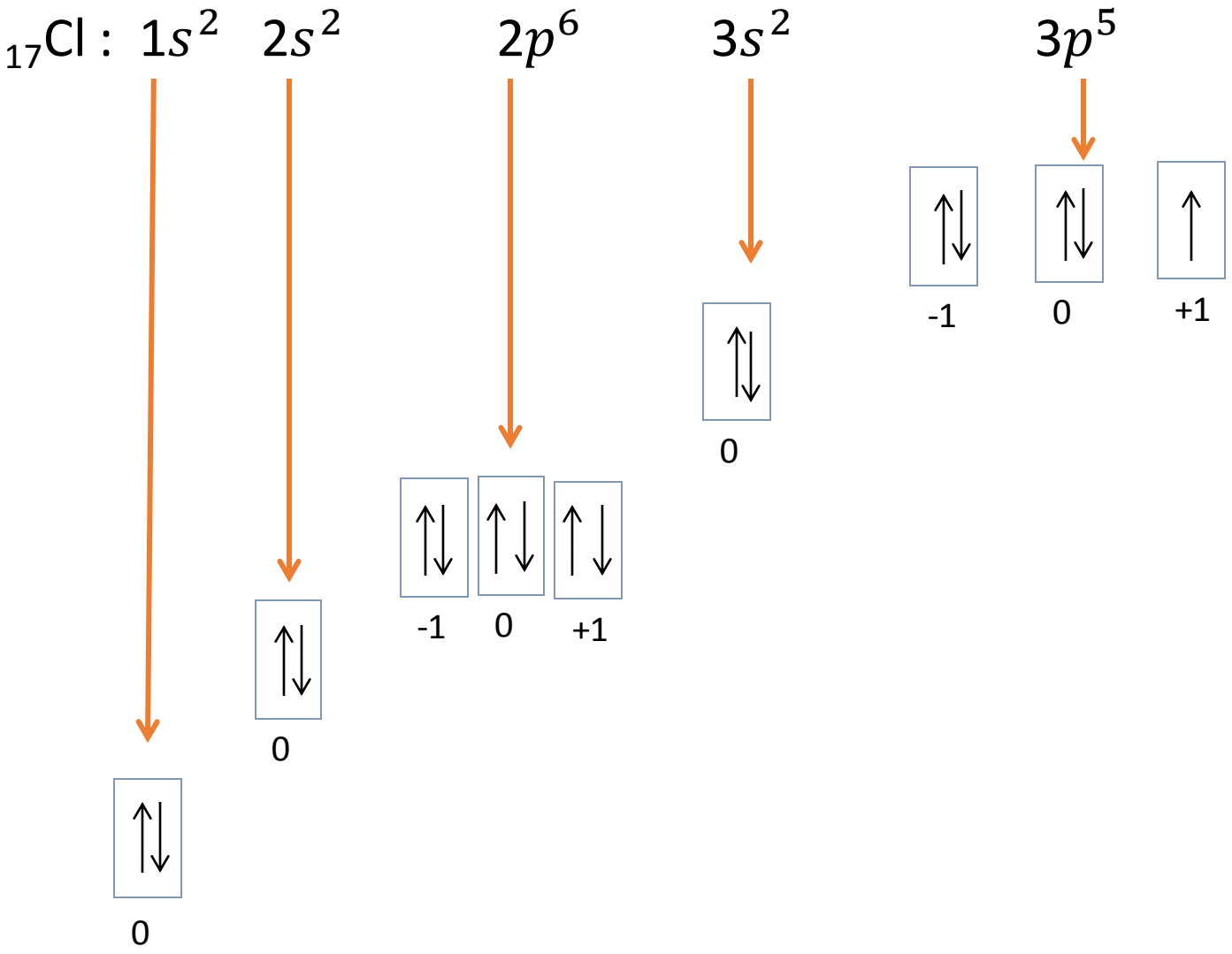
Subnivel de energía

Nivel de energía

La suma de todos los electrones debe ser 25 en este ejemplo: 2+2+6+2+6+2+5= 25

MODELO ATÓMICO ACTUAL

Distribución de los electrones de un átomo en sus respectivos orbitales:



MODELO ATÓMICO ACTUAL

Configuración Electrónica Simplificada:

Se realiza tomando como referencia la configuración electrónica de los **gases nobles**.

$1s^2$	$2s^2 2p^6$	$3s^2 3p^6$	$4s^2 3d^{10} 4p^6$	$5s^2 4d^{10} 5p^6$	$6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^6$	$7s^2 5f^{14} 6d^{10} 7p^6$
[He]	[Ne]	[Ar]	[Kr]	[Xe]	[Rn]	

Ejemplos:

$_{12}Mg$: $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2$ o [Ne] $3s^2$

$_{25}Mn$: $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 4s^2\ 3d^5$ o [Ar] $4s^2\ 3d^5$

MODELO ATÓMICO ACTUAL

Anomalías de la Configuración Electrónica:

Existen átomos (metales de transición) que no cumplen exactamente todas las reglas para la C.E. Es el caso de elementos cuyas C.E. terminan en d^4 o d^9; en estos átomos se busca cumplir la Regla de Hund; es decir, se trata de ocupar el mayor número de orbitales (siempre que ocupen todos los pertenecientes a un mismo subnivel), lo que les proporciona una estabilidad acrecentada.

Ejemplos:

$$_{24}Cr \Rightarrow \underbrace{[Ar]\,4s^2\,3d^4}_{\text{No !}} \Rightarrow [Ar]\,4s^1\,3d^5 \Rightarrow [Ar]\ \underset{4s}{\boxed{\uparrow}}\ \underset{3d}{\boxed{\uparrow}}\ \boxed{\uparrow}\ \boxed{\uparrow}\ \boxed{\uparrow}\ \boxed{\uparrow}$$

$$_{29}Cu \Rightarrow \underbrace{[Ar]\,4s^2\,3d^9}_{\text{No !}} \Rightarrow [Ar]\,4s^1\,3d^{10} \Rightarrow [Ar]\ \underset{4s}{\boxed{\uparrow}}\ \underset{3d}{\boxed{\uparrow\downarrow}}\ \boxed{\uparrow\downarrow}\ \boxed{\uparrow\downarrow}\ \boxed{\uparrow\downarrow}\ \boxed{\uparrow\downarrow}$$

Estas distribuciones se explican porque hay una estabilidad ligeramente mayor con los subniveles casi llenos ($3d^5$) y completamente llenos ($3d^{10}$)

MODELO ATÓMICO ACTUAL

Configuración Electrónica de Iones

Na [Ne]$3s^1$ — Na^+ [Ne]

Ca [Ar]$4s^2$ — Ca^{2+} [Ar]

Al [Ne]$3s^2 3p^1$ — Al^{3+} [Ne]

Átomos que pierden electrones para alcanzar configuración de Gas noble se denominan *Cationes*

* En el caso de iones monoatómicos positivos (cationes), los electrones perdidos se "quitan" del último nivel.

Átomos que ganan electrones para alcanzar configuración de gas noble, se denominan *Aniones*

F $1s^2 2s^2 2p^5$ — F^- $1s^2 2s^2 2p^6$ o [Ne]

O $1s^2 2s^2 2p^4$ — O^{2-} $1s^2 2s^2 2p^6$ o [Ne]

N $1s^2 2s^2 2p^3$ — N^{3-} $1s^2 2s^2 2p^6$ o [Ne]

* Para los iones monoatómicos negativos (aniones), los electrones ganados se "agregan" al final de la configuración.

ÁTOMOS ISOELECTRÓNICOS

Son aquellos que presentan igual número de electrones y la **misma configuración electrónica**.

Ejemplos:

$_{18}Ar$	$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6$
$_{16}S^{2-}$	$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6$
$_{15}P^{3-}$	$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6$
$_{17}Cl^{1-}$	$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6$

OBSERVACIÓN:

Sean los siguientes átomos:

$_{24}Cr$: [Ar] $4s^1\ 3d^5$

(24 e^-)

$_{26}Fe^{2+}$: [Ar] $4s^0\ 3d^6$

(24 e^-)

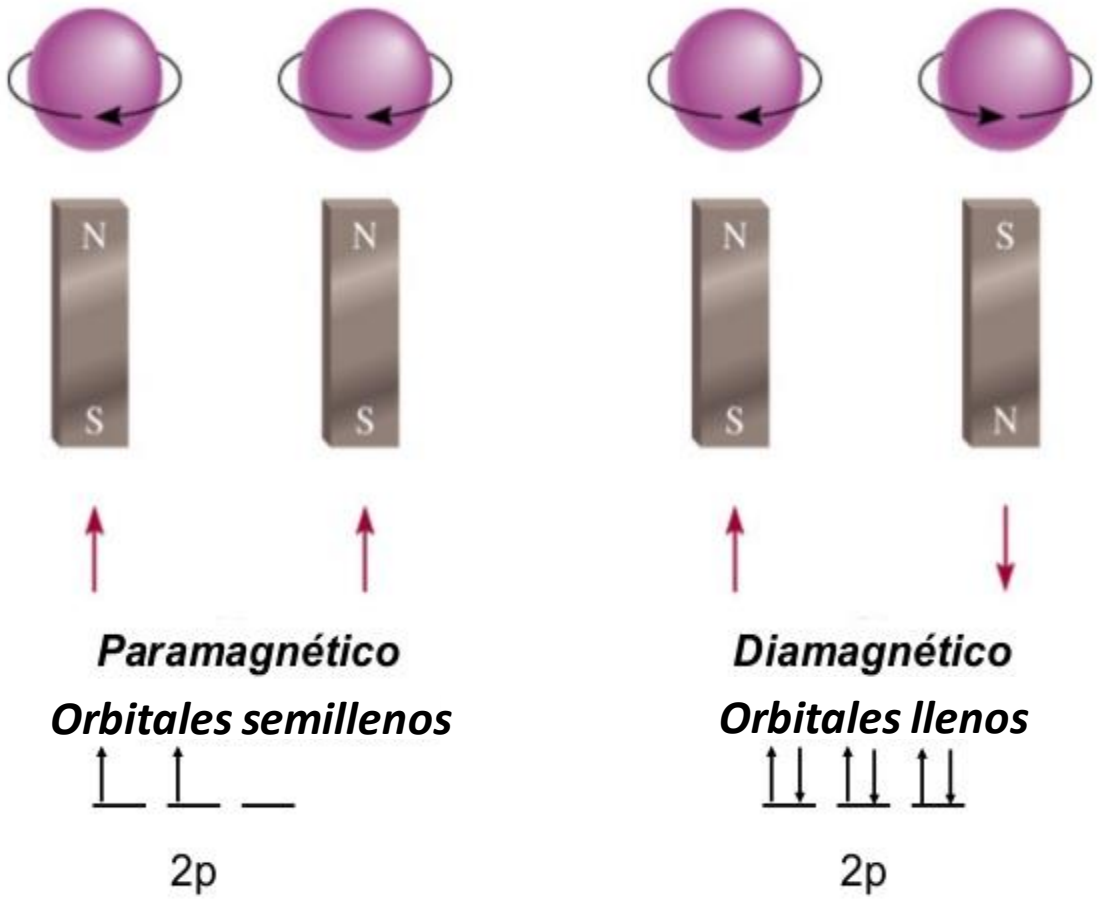
NO SON ÁTOMOS ISOELECTRÓNICOS

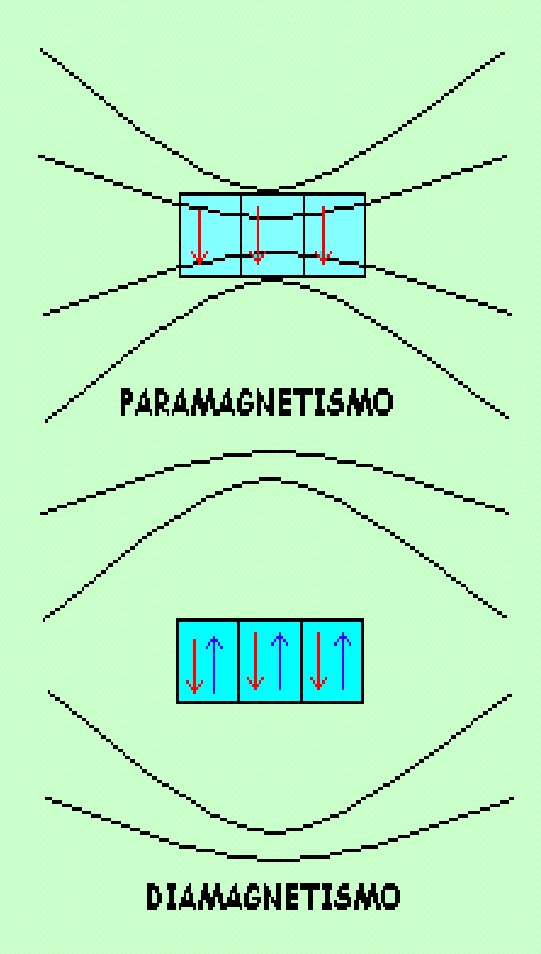
(DIFERENTE CONFIG. ELECTRÓNICA)

PROPIEDADES MAGNÉTICAS

* Se denominan **átomos diamagnéticos** a los átomos que tienen estructuras electrónicas en las cuales **todos sus electrones están apareados**. Son débilmente repelidos por los campos magnéticos.

* Los denominados **átomos paramagnéticos** tienen **uno o más electrones no apareados**. Estos átomos son débilmente atraídos dentro de los campos magnéticos.





MOMENTO DE PRACTICAR

PROBLEMAS Y RESOLUCIÓN

FIN DE LA SESIÓN

PRACTICA Y APRENDERÁS